

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0123U103623

Відкрита

Дата реєстрації: 05-09-2023

Статус виконавця: 17 - головний виконавець



1. Загальні відомості

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 0111010

Напрямок фінансування: 2.7 - інше (Стипендіальна робота в рамках іменної стипендії Верховної Ради України для молодих учених - докторів наук (Постанова Верховної Ради України від 09.08.2023 № 3297-IX))

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 161.040

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2023	161.040

2. Замовник

Назва організації: Управління справами Апарату Верховної Ради України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 20064120

Адреса: вул. Грушевського, буд. 5, м. Київ, 01008, Україна

Підпорядкованість: Верховна Рада України

Телефон: 380442552856

Телефон: 380442553166

Телефон: 380442552784

WWW: http://w1.c1.rada.gov.ua/pls/site2/p_aparat

3. Виконавець

Назва організації: Половкович Святослав Володимирович

Код ЄДРПОУ/ІПН: 3047510911

Підпорядкованість:

Адреса: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Телефон: 380977415507

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Дизайн та синтез конденсованих гетероциклічних систем на основі 1,4-хінонів, хіноксалінів та 1,3,5-триазинів

Назва роботи (англ)

Design and synthesis of condensed heterocyclic systems based on 1,4-quinones, quinoxalines and 1,3,5-triazines

Мета роботи (укр)

Метою даного дослідження є молекулярний дизайн та розробка методів синтезу шляхом використання реакцій нуклеофільного заміщення, циклоконденсації та циклоприєднання для отримання нових конденсованих та неконденсованих карбо- та гетероциклічних похідних хінонів, хіноксалінів і 1,3,5-триазинів з подальшою їх хімічною модифікацією та пошук серед них ефективних біологічно активних сполук. Очікується розробка нових синтетичних підходів із застосуванням мультикомпонентних, одnoreакторних, тандемних і доміно-варіантів постановки хімічних перетворень в синтезі складних поліциклічних гетероциклічних сполук. Заплановано розроблення методологій дизайну та синтезу комбінаторних бібліотек сполук, що можуть бути використані для створення ліків та одержання нових матеріалів. Розробка методів синтезу нових екзофункціоналізованих похідних 2,3-дихлоро-нафталін-1,4-діону, які ґрунтуються на реакції нуклеофільного заміщення. Передбачається проведення молекулярного дизайну структурних блоків, та синтез на їх основі анельованих полігетероциклічних похідних нафталін-1,4-діону з використанням реакції циклоконденсації. Встановити регіоселективний характер 1,3-дипольного циклоприєднання та реакції Дільса-Альдера ряду дієнів по 2-му або 3-му положенні 5-R-нафталін-1,4-діонів. Подальшого розвитку набудуть дослідження нових перетворень з використанням нафталін-1,4-діонів та їх похідних у ролі синтетичних аналогів електрондефіцитних алкенів у реакції [3+2] циклоприєднання. Заплановано провести віртуальний та *in vitro* скринінг протипухлинної, антитромботичної активності та антимікробної дії, виявити сполуки-лідери та висунути гіпотези щодо можливих механізмів їх дії.

Мета роботи (англ)

The purpose of this research is the molecular design and development of synthetic methods by using nucleophilic substitution, cyclocondensation and cycloaddition reactions to obtain new condensed and non-condensed carbo- and heterocyclic derivatives of quinones, quinoxalines and 1,3,5-triazines, followed by their chemical modification and search among them effective biologically active compounds. The development of new synthetic approaches with the use of multicomponent, single-reactor, tandem, and domino variants of chemical transformations in the synthesis of complex polycyclic heterocyclic compounds is expected. It is planned to develop methodologies for the design and synthesis of combinatorial libraries of compounds that can be used to create drugs and to obtain new materials. Development of methods for the synthesis of new exofunctionalized derivatives of 2,3-dichloro-naphthalene-1,4-dione, which are based on the reaction of nucleophilic substitution is planned. The molecular design of structural blocks and the synthesis of annelated polyheterocyclic derivatives of naphthalene-1,4-dione based on them using the cyclocondensation reaction are expected. To establish the regioselective character of 1,3-dipolar cycloaddition and Diels-Alder reaction of a series of dienes at the 2nd or 3rd position of 5-R-naphthalene-1,4-diones will be studied. Research on new transformations using naphthalene-1,4-diones and their derivatives as synthetic analogues of electron-deficient alkenes in the [3+2] cycloaddition reaction will gain further development. It is planned to carry out virtual and *in vitro* screening of antitumor, antithrombotic activity and antimicrobial action, to identify lead compounds and put forward hypotheses regarding possible mechanisms of their action.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Отримані результати будуть використані у науковому середовищі для покращення теоретичних уявлень, методології та синтетичного інструментарію як у органічній хімії, так і в споріднених природничих науках. У навчальному процесі результати можуть бути використані у лекційних освітніх курсах з органічної хімії, у навчальних

дисциплінах “Медична хімія”, “Біоорганічна хімія”, “Хімія гетероциклічних сполук”, “Методи органічного синтезу”

Експерти

Обушак Микола Дмитрович (д. х. н., професор)

Лесик Роман Богданович (д. фармацевт. н., професор)

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	01.2023	06.2024	Остаточний звіт	Дизайн та синтез конденсованих гетероциклічних систем на основі 1,4-хінонів, хіноксалінів та 1,3,5-триазинів

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27, 31.23, 31.21

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.9;577.1, 547

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Бобало Юрій Ярославович (д.т.н., професор)

Керівники роботи:

Половкович Святослав Володимирович (д. х. н., доц.)

Відповідальний за подання документів: Половкович Святослав Володимирович (Тел.: +38 (097) 741-55-07)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.